

Raport științific

privind implementarea proiectului

Modelare accelerată a dispozitivelor cuantice hibride

– Etapele III-VI, Ianuarie - Decembrie 2024 –

Prezentul raport conține rezultatele obținute în cadrul proiectului în corelație cu structura planului de lucru.

Rezumat - Etapa III. Am explorat din punct de vedere teoretic posibilitatea de a realiza faza topologică Haldane protejată de simetrii a lanțurilor de spini-1 într-o platformă hibridă de insule supraconductoare (SI) și puncte cuantice (eng. quantum dots, QD). Pornind de la rezultate recente sugerând că un bloc QD-SI-QD (DSD) se poate comporta ca o unitate robustă de spin 1, am studiat comportamentul lanțurilor lungi având multe astfel de unități cuplate între ele. Modelarea eficientă a acestora a fost posibilă prin folosirea surrogate model solver (SMS) [Phys. Rev. B 108, L220506 (2023), Phys. Rev. B 109, 224501 (2024)], metodă dezvoltată în cadrul etapelor anterioare ale proiectului.

Rezultate principale - Etapa III. Rezultatele numerice indică faptul că lanțurile DSD prezintă caracteristicile emblematice ale fazei Haldane, precum stările de margine cu spin fracționar 1/2 și prezența parametrilor de ordine non-locali, care persistă într-o regiune semnificativă a spațiului de parametri. Rezultatele obținute sunt încurajatoare în vederea implementării experimentale a acestor dispozitive.

Lanțuri Haldane de spin 1 bazate pe dispozitive hibride semiconductor-supraconductor

Am modelat lanțul DSD de lungime N (reprezentat în Fig. 1 pentru $N = 3$) pornind de la Hamiltonianul total

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \hat{H}_{\text{DSD},n} + t_d \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} (d_{nR\sigma}^\dagger d_{n+1,L,\sigma} + \text{h.c.}) , \quad (1)$$

unde $d_{n\alpha\sigma}^\dagger$ creează un electron cu spin σ în QD-ul $\alpha = \text{L,R}$ a unității n a lanțului. Toate unitățile sunt considerate a fi identice și de a fi descrise de Hamiltonianul

$$\hat{H}_{\text{DSD}} = \hat{H}_{\text{QD,L}} + \hat{H}_{\text{SI}} + \hat{H}_{\text{QD,R}} + \hat{H}_{\text{tunn}} . \quad (2)$$

Pentru fiecare QD $\alpha = \text{L,R}$ am folosit Hamiltonianul de interacție constantă

$$\hat{H}_{\text{QD},\alpha} = \epsilon_d (d_{\alpha\uparrow}^\dagger d_{\alpha\uparrow} + d_{\alpha\downarrow}^\dagger d_{\alpha\downarrow}) + U d_{\alpha\uparrow}^\dagger d_{\alpha\uparrow} d_{\alpha\downarrow}^\dagger d_{\alpha\downarrow} , \quad (3)$$

unde U este tăria repulsiei electron-electron și ϵ_d este poziția nivelului energetic al QD-ului, considerat în punctul simetric având $\epsilon_d = -U/2$. Pentru modelarea SI și a cuplajelor sale, am folosit metodologia SMS [Phys. Rev. B 108, L220506 (2023), Phys. Rev. B 109, 224501 (2024)], descrisă în etapele anterioare. Concret, Hamiltonian-ul SI este dat de

$$\hat{H}_{\text{SI}} = \sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \tilde{\xi}_\ell c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} - \sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} (\Delta c_{\ell\uparrow}^\dagger c_{\ell\downarrow}^\dagger e^{-i\phi} + \text{h.c.}) + E_c \left(\sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} + 2\hat{N}_p - n_0 \right)^2 , \quad (4)$$

unde convențiile folosite sunt aceleași ca în etapele anterioare. Termenul de cuplaj QD-SI care apare în ecuația (2) este dat de

$$\hat{H}_{\text{tunn}} = \sum_{\alpha=\text{L,R}} \sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \sqrt{\gamma_\ell \Gamma_\alpha} (c_{\ell\sigma}^\dagger d_{\alpha\sigma} + \text{h.c.}) , \quad (5)$$

Pentru modelul minimal cu $\tilde{L} = 2$ în fiecare SI considerat aici, valorile numerice ale parametrilor sunt $\gamma_{1,2} = 1.246\Delta$ și $\tilde{\xi}_{1,2} = \pm 1.31\Delta$. Modelele mai complexe cu $\tilde{L} \geq 3$ aduc doar mici diferențe cantitative rezultatelor finale, fără a afecta analiza calitativă.

Odată cu creșterea dimensiunii liniare a lanțului DSD, două proprietăți specifice ale fazei Haldane se manifestă, anume scăderea exponențială a gap-ului dintre stările de spin-singlet și spin-triplet, precum și convergența energiei de excitație a stării de spin-quintuplet la valoarea gap-ului Haldane, a se vedea Fig. 2. În cadrul acestei figuri, am reprezentat și rezultatele corespunzătoare modelului bilinear-biquadratic (BLBQ) de spini-1 ideali, definit prin

$$\hat{H}_{\text{BLBQ}} = J_{\text{AF}} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \beta (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2 \right], \quad (6)$$

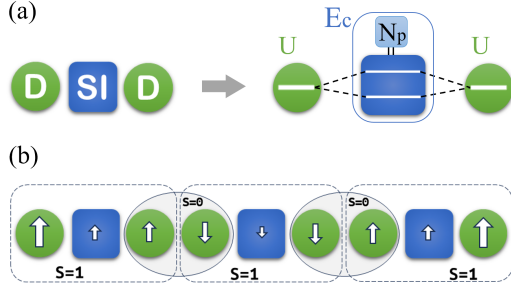


Fig. 1: Modelarea unității DSD în abordarea SMS cu $\tilde{L} = 2$ nivele în SI (b) Reprezentare schematică a lanțului DSD cu $N = 3$ în starea fundamentală având $S_{\text{tot}} = S_{z,\text{tot}} = 1$. Tăria legăturii $S = 0$ este direct legată de elementul de matrice de tunelare QD-QD din ecuația (1).

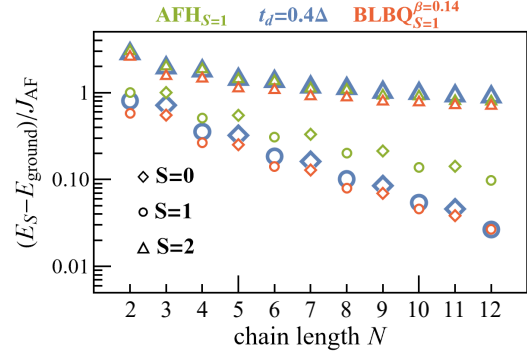


Fig. 2: Spectrul energetic pentru lanțurile DSD, BLBQ($\beta = 0.14$) și AFH=BLBQ($\beta = 0$) relativ la starea fundamentală de spin-singlet (triplet) pentru lanțuri de lungime pară (impară). Parametrii lanțurilor DSD sunt $U = -2\epsilon_d = 6\Delta$, $\Gamma = 3\Delta$, $E_c = 2\Delta$, $t_d = 0.4\Delta$ și $J_{\text{AF}} = 0.0205\Delta$.

Lanțuri de lungimi mai mari arată trăsături specifice ale fracționalizării de spin-1/2 la margini, a se vedea figura 3a. Aici, media spinului în starea fundamentală $S_{\text{tot}} = S_{z,\text{tot}} = 1$ a lanțului DSD cu $N = 21$ prezintă profilul caracteristic alternant ce descrește în amplitudine departe de margini. În regimul de cuplaj puternic QD-QD, unitatile DSD de-a lungul lanțului suferă fluctuații semnificative ale spinului, pierzând proprietățile caracteristice ale unităților de spin-1 ideale.

Lanțul relativ lung $N = 41$ are o regiune de bulk suficient de mare pentru a permite o investigație pertinentă a diverselor funcții de corelație relevante fazei Haldane. Corelatorii adecvați aici sunt parametrii de ordine non-locali de forma

$$g_{\mathcal{O},\mathcal{U}}(d) = \left\langle \hat{\mathcal{O}}_p \left(\prod_{j=p+1}^{p+d-1} \hat{\mathcal{U}}_j \right) \hat{\mathcal{O}}_{p+d} \right\rangle, \quad (7)$$

care sondează proprietățile de transformare ale bulk-ului la o simetrie $\mathcal{U}$, ca de exemplu o rotație în jurul axei z cu π , $R^z = \exp(i\pi S_z)$.

Pentru $\mathcal{O} = S_z$ și $\mathcal{U} = 1$, ecuația de mai sus se reduce la funcția de corelație spin-spin $g_{S_z,1} = \langle \hat{S}_{z,p} \hat{S}_{z,p+d} \rangle$, care este de distanță scurtă intrucât nu are loc ruperea spontană a simetriei rotaționale în faza Haldane, a se vedea Fig. 4a.

Pentru $\mathcal{O} = 1$ și $\mathcal{U} = R^z$ avem cazul corelatorului g_{1,R^z} care este nenul pentru d mare în cazul configurațiilor topologic nontriviale. În Fig. 4b, atât timp cât t_d nu este prea mare, corelatorul g_{1,R^z} descrește conform așteptărilor pentru faza Haldane unde simetria de bulk $SO(3)$ fracționalizează în simetria de margine $SU(2)$. Pentru o valoare mai mare precum $t_d = 2\Delta$ unde caracterul de spin-1 al unităților DSD este în mare măsură pierdut, corelatorul manifestă o valoare finită și pozitivă, indicând o configurație trivială.

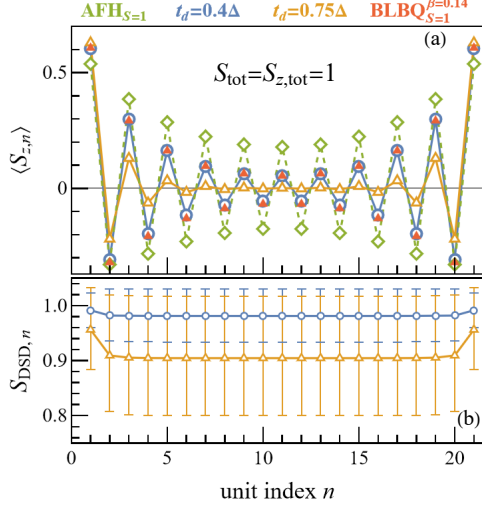


Fig. 3: (a) Densitatea medie de spin $\langle S_z \rangle$ de-a lungul lanțurilor $N = 21$ DSD, AFH și BLBQ ($\beta = 0.14$) în starea fundamentală $S_{\text{tot}} = S_{z,\text{tot}} = 1$. (b) Spin total efectiv $S_{\text{DSD},n}$ definit pentru fiecare unitate DSD $n = 1, \dots, 21$ prin $S_{\text{DSD}}(S_{\text{DSD}} + 1) = \langle \tilde{S}_{\text{DSD}}^2 \rangle$, împreună cu estimarea fluctuațiilor sale. Ceilalți parametri sunt $U = -2\epsilon_d = 6\Delta$, $\Gamma = 3\Delta$, $E_c = 2\Delta$.

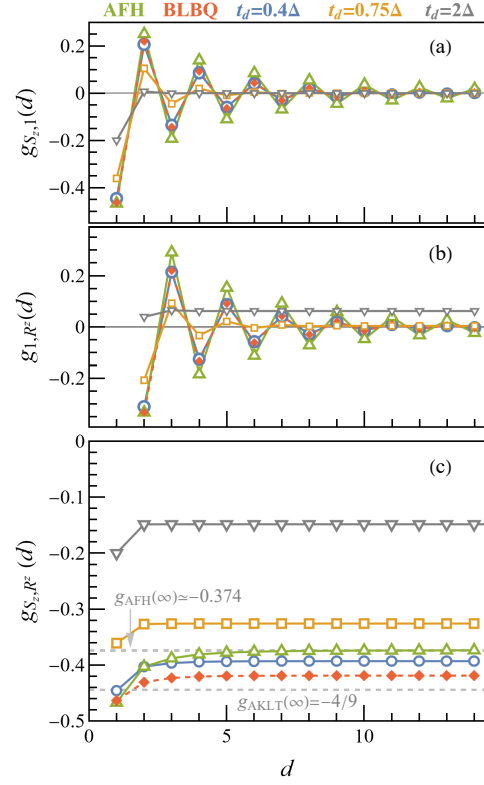


Fig. 4: Funcțiile de corelație $g_{\mathcal{O},\mathcal{U}}(d)$ din ecuația (7) pentru $\mathcal{O} = S_z$ și $\mathcal{U} = 1$ (a), $\mathcal{O} = 1$ și $\mathcal{U} = R^z$ (b), $\mathcal{O} = S_z$ și $\mathcal{U} = R^z$ (c), în regiunea de bulk ($p = 14$) a lanțului $N = 41$. Ceilalți parametri sunt $U = -2\epsilon_d = 6\Delta$, $\Gamma = 3\Delta$, $E_c = 2\Delta$.

Faza Haldane prezintă o ordine antiferomagnetică ascunsă care poate fi evidențiată folosind parametrul de ordine non-local g_{S_z,R^z} obținut din ecuația (7) cu $\mathcal{O} = S_z$ și $\mathcal{U} = R^z$. Fig. 4c arată o valoare bine definită acestui corelator, cu valori apropiate de cazul ideal BLBQ pentru valori moderate $t_d = 0.4\Delta$. Valoarea corelatorului este semnificativ redusă pentru $t_d = 2\Delta$, pentru care corelatorul menționat anterior g_{1,R^z} avea de asemenea ordine long-range.

Pentru interpretarea rezultatelor legate de parametrii de ordine, este important de menționat că simetria $\text{SO}(3)$ originală a unei unități DSD izolate este automat extinsă la $\text{SU}(2)$ pentru orice valoare finită a cuplajului t_d . Cu toate că faza Haldane este conectată adiabatic cu o fază trivială, fenomenele sale caracteristice rămân stabile din punct de vedere parametric.

Modelul considerat aici poate fi extins, de exemplu prin includerea unui câmp magnetic extern pentru a defini un qubit singlet-triplet protejat de decoerență de gap-ul Haldane.

Unul din avantajele platformei super-semi constă în ușurința de a construi unități de spin mai înalte. Prin cuplajul a N QD-uri la aceeași SI se obține o unitate robustă cu spin $S = \mathcal{N}/2$ unit. Aceasta ar permite realizarea de modele de spin mai generale în diverse geometrii, de exemplu pentru spini-3/2 în rețele hexagonale realizate cu unitatea QD³-SI.

Rezumat - Etapa IV. În cadrul acestei etape, am studiat din punct de vedere teoretic blocul QD-SI-QD în regimul de lanț Kitaev minimal, unde este posibilă identificarea de moduri Majorana în puncte discrete ale spațiului de parametri (eng., poor man's Majorana, PMM), cu implicații în design-ul de hardware pentru calculul cuantic. De asemenea, am studiat și dispozitivul mai complex cu patru QD-uri cuplate printr-o SI (eng., poor man's Majorana tetron), util pentru observații asupra non-localității modurilor Majorana și a conductanței lor fracționare.

Rezultate principale - Etapa IV. Rezultatele obținute indică existența de moduri PMM stabile în prezența repulsiei Coulomb din SI, precum și în cazul în care SI nu se află în punctul de degenerare de sarcină. Pentru dispozitivul PMM-tetron, rezultatele indică existența de regiuni din spațiul de parametri având o stare fundamentală dublu-degenerată de paritate fermionică negativă. Aceasta poate conduce la un model efectiv de impuritate Anderson în prezența de terminale externe, și la apariția efectului Kondo topologic pentru valori specifice ale parametrilor experimentali.

Moduri Majorana în sisteme hibride de QD-uri cuplate prin insule supraconductoare

Pentru descrierea sistemului QD-SI-QD în regimul de lanț Kitaev minimal, folosim Hamiltonianul pentru QD-uri

$$H_d = \sum_{\nu,\sigma} \varepsilon_{\nu\sigma} d_{\nu\sigma}^\dagger d_{\nu\sigma} + U_\nu n_{\nu\uparrow} n_{\nu\downarrow}, \quad (8)$$

unde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ indică spinul electronic și $\varepsilon_{\nu\uparrow} = \varepsilon_{\nu\downarrow} - E_Z \equiv \varepsilon_\nu$, unde E_Z reprezintă energia Zeeman din QD-uri. Pentru SI, folosim o prescripție $L = 1$,

$$H_{SI} = \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \varepsilon_c c_\sigma^\dagger c_\sigma - (\Delta c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger e^{-i\hat{\phi}} + \text{H.c.}) + E_c \left(\hat{N}_I - n_g \right)^2, \quad (9)$$

iar în termenul de tunelare considerăm atât factori ce conservă spinul, cât și amplitudini ce inversează spinul,

$$H_T = \sum_{\sigma\nu} (t_\nu d_{\nu\sigma}^\dagger c_\sigma + s_\nu s_\sigma t_\nu^{\text{SO}} d_{\nu\sigma}^\dagger c_{\bar{\sigma}} + \text{H.c.}), \quad (10)$$

Pentru a analiza modurile PMM care apar în cadrul acestui model microscopic, folosim polarizarea Majorana (MP), definită ca

$$\text{MP}(\nu) = \frac{\sum_\sigma (w_{\nu\sigma}^2 - z_{\nu\sigma}^2)}{\sum_\sigma (w_{\nu\sigma}^2 + z_{\nu\sigma}^2)}, \quad (11)$$

amplitudinile w, z fiind date de combinațiile $w_{\nu\sigma} = \langle N | (e^{i\hat{\phi}} d_{\nu\sigma} + d_{\nu\sigma}^\dagger) | N-1 \rangle$ și $z_{\nu\sigma} = \langle N | (e^{i\hat{\phi}} d_{\nu\sigma} - d_{\nu\sigma}^\dagger) | N-1 \rangle$. Aici, $|N\rangle$ indică starea de energie cea mai joasă de sarcină totală N a sistemului. Valori ale MP aproape de ± 1 sunt specifice situațiilor unde un mod PMM local face legătura între stările cele mai joase de paritate fermionică opusă.

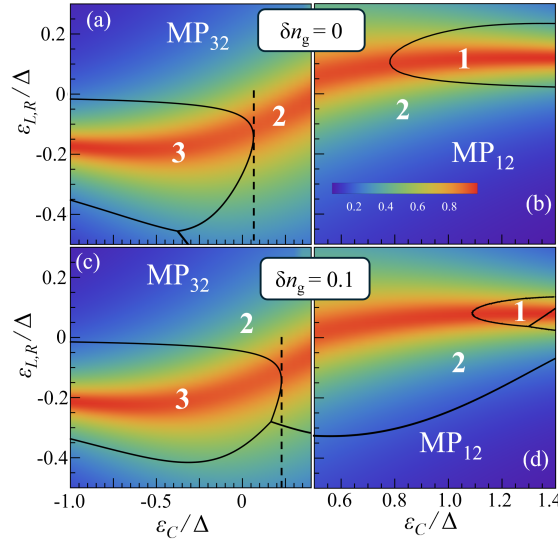


Fig. 5: Polarizarea Majorana la $\delta n_g = n_g - n_{g,0} = 0$ (a,b) și $\delta n_g = 0.1$ (c,d), cu $n_{g,0} = 1$ sarcina de referință (impară). Parametrii sistemului sunt $U_{L,R} = 5\Delta$, $t_{L,R} = 0.5\Delta$, $t_{L,R}^{\text{SO}} = 0.1\Delta$, $E_{Z;L,R} = 1.5\Delta$, $E_c = 0.2\Delta$.

În Fig. 5 considerăm MP în vecinătatea punctului de degenerare de sarcină, $n_g = n_{g,0}$, unde $n_{g,0}$ este un număr întreg impar. În particular, reprezentăm polarizarea MP_{ij} calculată între stările fundamentale cu număr total de electroni i și j . Curbele negre indică degenerările dintre stările fundamentale cu paritate fermionică pozitivă și negativă. Modurile PMM corespund punctelor unde

$|MP| \approx 1$ și starea fundamentală este degenerată. În punctele de degenerare de sarcină $n_g = n_{g,0}$, sistemul prezintă PMM pentru aceleași condiții ca și în situația de neinteracție.

Prin creșterea n_g de la $n_{g,0}$ la $n_{g,0} + 0.1$, regiunea din spațiul parametrilor cu un număr de particule mai mic, $N = n_{g,0}$, se micșorează, și, în același timp, stările cu $N = n_{g,0} + 2$ electroni ating o energie mai joasă. Pentru un detuning moderat $\delta n_g = 0.1$, sistemul prezintă moduri PMM caracterizate de o polarizare semnificativă și stări degenerate de paritate fermionice opuse.

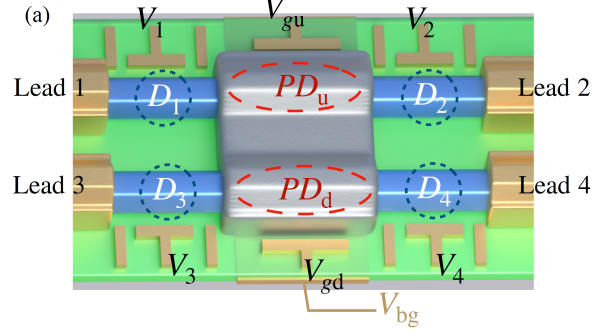


Fig. 6: Schiță a dispozitivului PMM-tetron: doua nano-fire semiconductoare (albastru) sunt conectate printr-o insula supraconductoare (gri); un set de porți electrostatice sunt folosite pentru a defini QD-urile D_i de fiecare parte a nano-firelor (cercuri). Dispozitivul poate fi conectat la patru terminale externe (contactele auri laterale) pentru a explora fizica emergentă Kondo.

Pentru modelarea microscopică a dispozitivului PMM-tetron reprezentat în fig. 6, folosim Hamiltonianul

$$H_{\text{sp}} = \sum_{\substack{a=L,R \\ s=\uparrow,\downarrow \\ \tau=u,d}} \mu_D d_{a s \tau}^\dagger d_{a s \tau} + g B_z \sum_{\substack{s,s'=\uparrow,\downarrow \\ a=L,R \\ \tau=u,d}} d_{a s \tau}^\dagger \sigma_{ss'}^z d_{a s' \tau} + g_{\text{SC}} B_z \sum_{\tau,s,s'=\uparrow,\downarrow} c_{s \tau}^\dagger \sigma_{ss'}^z c_{s' \tau} + \sum_{\substack{s=\uparrow,\downarrow \\ \tau=u,d}} \mu_{\text{SC}} c_{s \tau}^\dagger c_{s \tau} \\ + \Delta \sum_{\tau=u,d} \left(c_{\uparrow \tau}^\dagger c_{\downarrow \tau}^\dagger e^{i\varphi} + \text{H.c.} \right) - \sum_{\substack{s,s'=\uparrow,\downarrow \\ a=L,R \\ \tau=u,d}} t_{a \tau} \left[c_{s \tau}^\dagger \left(e^{-i a \alpha_\tau \sigma_y} \right)_{ss'} d_{a s' \tau} + \text{H.c.} \right] + E_c (N_{\text{SI}} - n_g)^2. \quad (12)$$

Acest model generalizează tratamentul pentru sistemul QD-SI-QD din secțiunea precedentă, $\tau=u,d$ se referindu-se la indicele nano-firului (eng, up/down).

Fig. 7 arată cum regiunea din spațiul de parametri având starea fundamentală $N_t = 3$ evoluează în planul μ_D, n_g în regimul de tunelare slabă. Gap-ul energetic δE calculat numeric prin diagonalizarea exactă a Hamiltonianului de mai sus este în acord cu o abordare analitică perturbativă.

Fig. 8 arată în schimb rezultatele obținute într-un regim cu o hibridizare mai puternică între QD-uri și insula supraconductoare. În particular, considerăm $\Delta = 2t$ și ilustrăm extensia regiunii cu stare fundamentală $N_t = 3$ în planul μ_D, n_g pentru diverse valori ale μ_{SC} . În acest scenariu, stările de paritate fermionica negativă domină pe o regiune considerabil mărită a spațiului de parametri, cu gap-urile asociate crescând de asemenea odată cu amplitudinea t . Compararea dintre cele două figuri sugerează că efectul Kondo este mai ușor observabil pentru o amplitudine de tunelare t mai mare, pentru un interval semnificativ de energii E_c ale insulei supraconductoare.

Rezumat - Etapa V. În cadrul acestei etape, am extins aplicabilitatea modelelor surogat dezvoltate în etapele I-II ale proiectului la sisteme supraconductoare cu mai multe specii fermionice. În particular, am studiat efectele asupra sistemelor cu două specii fermionice induse de prezența unei impurități cuantice, descrise de modele de tip Kondo.

Rezultate principale - Etapa V. Rezultatele numerice indică prezența unor noi tranziții de fază absente în abordările rudimentare existente în literatură bazate, de exemplu, pe impurități clasice.

Modele Kondo surogat pentru sisteme supraconductoare cu mai multe specii fermionice.

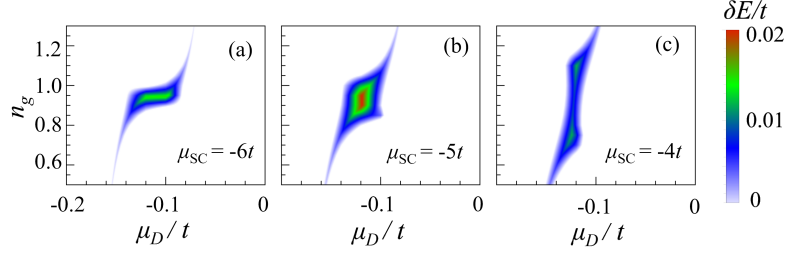


Fig. 7: Energia de excitație $\delta E/t = \min(\delta E_{\pm}^{(2)}, \delta E_{\pm}^{(4)})/t$ vs μ_D și n_g pentru $\mu_{SC}/t = -6, -5, -4$. Doar regiunea cu starea fundamentală $N_t = 3$ este reprezentată. Ceilalți parametri sunt $\Delta = 4t$, $\alpha = \pi/6$, $E_C = 0.15t$, $E_Z = 1.5\Delta$.

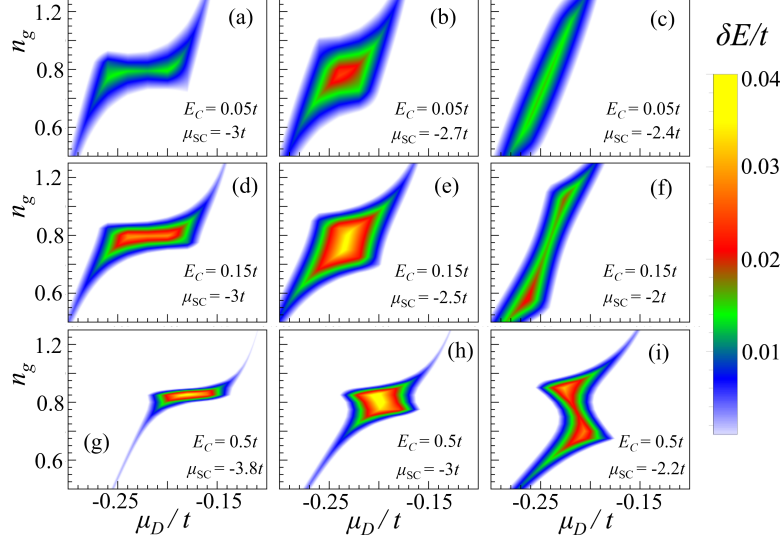


Fig. 8: Energia de excitație $\delta E/t = \min(\delta E_{\pm}^{(2)}, \delta E_{\pm}^{(4)})/t$ vs μ_D și n_g în regimul non-perturbativ la $\Delta = 2t$ pentru diverse valori ale μ_{SC} și E_C . Doar regiunea cu starea fundamentală $N_t = 3$ este reprezentată. Ceilalți parametri sunt $\alpha = \pi/6$, $E_Z = 1.5\Delta$.

Am considerat un model Kondo pentru doua specii fermionice (u, d) cu un grad de libertate non-abelian ("culoare") cuplate la o impuritate cuantică,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{Kondo}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{exc}} \quad (13)$$

unde

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \int d^3x \{ \psi^\dagger (i v \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla - \mu) \psi - \frac{\Delta}{2} [\psi^T \sigma_2 \tau_2 t_2 \psi + \text{H.c.}] \} \quad , \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{exc}} = J_0 \mathbf{T}_{\text{imp}} \cdot \psi^\dagger(\mathbf{0}) \mathbf{t} \psi(\mathbf{0}) \quad (14)$$

Aici, $\psi = (u_\uparrow^\dagger, d_\uparrow^\dagger, u_\downarrow^\dagger, d_\downarrow^\dagger, u_\uparrow^\dagger, d_\uparrow^\dagger, u_\downarrow^\dagger, d_\downarrow^\dagger)^T$, unde $(\uparrow, \downarrow)$, $(\uparrow, \downarrow)$ și (u, d) indică proiecțiile spin-ului, culorii și, respectiv, ale speciei fermionice iar $\mathbf{T}_{\text{imp}}$ reprezintă pseudo-spin-ul impurității cu magnitudine $T = 1/2$. În baza Nambu $\Psi_{\mathbf{k}} = (\psi_{\mathbf{k}} \ \psi_{-\mathbf{k}})^T$, ecuația (14) devine

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad , \quad \mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} (-v\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mu) \otimes \mathbb{1}_4 & -\Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 \\ -\Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 & (-v\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}^T + \mu) \otimes \mathbb{1}_4 \end{pmatrix} \quad , \quad (15)$$

Funcția Green integrată după impuls $G_0(\mathbf{k}, i\omega) = 1/(i\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}})$, sau self-energia de tunelare Σ_T , este dată de

$$J_0 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} G_0(\mathbf{k}, i\omega) = J_0 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\mathcal{X}^2 - 4\mu^2 v^2 k^2} \begin{pmatrix} [(i\omega - \mu)\mathcal{X} - 2\mu v^2 k^2] \mathbb{1}_8 & -\Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 \mathcal{X} \\ -\Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 \mathcal{X} & [(i\omega + \mu)\mathcal{X} + 2\mu v^2 k^2] \mathbb{1}_8 \end{pmatrix} \quad , \quad (16)$$

unde $\mathcal{X} = -\omega^2 - \mu^2 - \Delta^2 - v^2 k^2$. Pentru $\Delta \ll \mu$, avem simplificarea $\mathcal{X} \approx -\mu^2 - v^2 k^2$. Prin restrângerea domeniului de integrare la o lărgime de bandă D în jurul mării Fermi, obținem $\mathcal{X} \approx$

$-2\mu^2$ și

$$\Sigma_T = \mathcal{J} \begin{pmatrix} -i\omega \mathbb{1}_8 & \Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 \\ \Delta \sigma_2 \tau_2 t_2 & -i\omega \mathbb{1}_8 \end{pmatrix} g(\omega) \quad , \quad g(\omega) \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-D}^D d\xi \frac{1}{\xi^2 + \Delta^2 + \omega^2} = \frac{2}{\pi} \frac{\arctan\left(\frac{D}{\sqrt{\Delta^2 + \omega^2}}\right)}{\sqrt{\Delta^2 + \omega^2}} \quad (17)$$

unde $\mathcal{J} = \pi\rho(\mu)J_0/2$, este exprimat în termeni de densitatea de stări, $\rho(\mu) = \mu^2/(2\pi^2 v^3)$.

Self-energia de tunelare menționată anterior apare în cadrul funcției de partiție corespunzătoare ecuației (13), ce poate fi scrisă schematic ca

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \, e^{J_0 \mathbf{T}_{\text{imp}} \cdot (\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger) \mathbf{t} (\sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger G_0^{-1} \psi_{\mathbf{k}})} \quad , \quad (18)$$

În urma unei transformări Hubbard-Stratonovich asupra termenului de schimb, obținem formal

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\eta \, e^{\eta^\dagger (\mathbf{T}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{t})^{-1} \eta + [\sqrt{J_0} \sum_{\mathbf{k}} \eta^\dagger \psi_{\mathbf{k}} + \text{H.c.}] + \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger G_0^{-1} \psi_{\mathbf{k}}} \quad . \quad (19)$$

Fermionii ψ pot fi integrați, fiind cuplați liniar la câmpul auxiliar η field, ducând la

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\eta \, e^{\eta^\dagger (\mathbf{T}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{t})^{-1} \eta + \eta^\dagger \Sigma_T \eta} \quad . \quad (20)$$

În această forma, funcția g de mai sus (și implicit self-energia de tunelare) a modelului BCS complet poate fi aproximată în cadrul abordării SMS prin cea corespunzătoare unui model surogat cu un număr mic de nivele efective, având Hamiltonianul $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{Kondo}} = \tilde{\mathcal{H}}_0 + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{exc}}$, unde

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} \tilde{\xi}_\ell \tilde{c}_\ell^\dagger \tilde{c}_\ell - \frac{\Delta}{2} [\tilde{c}_\ell^T \sigma_2 \tau_2 t_2 \tilde{c}_\ell + \text{H.c.}] \quad , \quad \tilde{\mathcal{H}}_{\text{exc}} = \mathcal{J} \mathbf{T}_{\text{imp}} \cdot \sum_{\ell, \ell'=1}^{\tilde{L}} \sqrt{\gamma_\ell \gamma_{\ell'}} \tilde{c}_\ell^\dagger \mathbf{t} \tilde{c}_{\ell'} \quad . \quad (21)$$

Rezultatele numerice obținute pornind de la acest Hamiltonian sunt prezentate în figurile 9, 10, 11. În particular, toate modelele surogat indică prezența a două tranziții de fază odată cu creșterea tăriei interacției de schimb dintre impuritate și mediul supraconductor, a se vedea fig.9. Acestea se datorează numărului variabil de cuasiparticule supraconductoare care participă la procesul de ecranare al impurității cuantice, a se vedea fig. 10. Pentru a reproduce semi-cantitativ proprietățile detaliate ale procesului de ecranare, este nevoie de utilizarea a cel puțin două nivele surogat, a se vedea fig. 11. Validarea metodologiei SMS pentru modele de tip Kondo este inclusă în fig.12, unde am reprezentat rezultatele pentru o singură specie fermionică ce rezultă fi în acord cu cele obținute folosind modelul Anderson [Phys. Rev. B 108, L220506 (2023)].

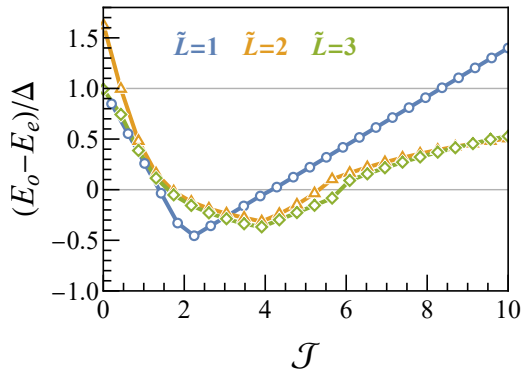


Fig. 9: Diferența de energie între cele mai joase stări de paritate fermionică pozitivă și negativă ale modelelor Kondo surogat pentru $\tilde{L} = 1, 2, 3$ vs tăria cuplajului de schimb $\mathcal{J}$.

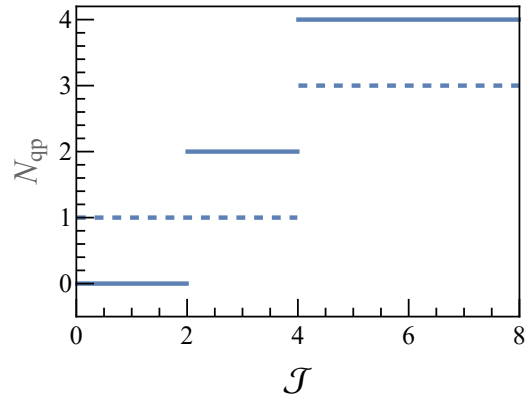


Fig. 10: Numărul de cuasiparticule din supraconductor din cele mai joase stări de paritate fermionică pozitivă și negativă ale modelului Kondo surogat $\tilde{L} = 1$ vs tăria cuplajului de schimb $\mathcal{J}$.

Rezumat - Etapa VI. În cadrul acestei etape, am formulat o generalizare a metodei Eigenvector Continuation / Reduced Basis Method (RBM) pentru modelarea eficientă a sistemelor cuantice în

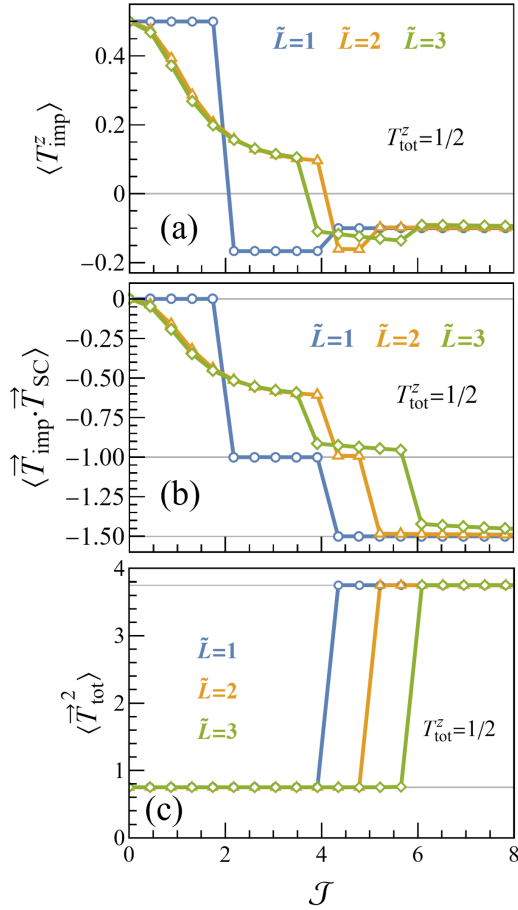


Fig. 11: Proprietățile de pseudo-spin ale celei mai joase stări $T_{\text{tot}}^z = 1/2$ vs tăria cuplajului de schimb $\mathcal{J}$ pentru modelele Kondo surogat $\tilde{L} = 1, 2, 3$. (a) Media pseudo-spinului impurității $\langle T_{\text{imp}}^z \rangle$. (b) Funcția de corelație $\langle \vec{T}_{\text{imp}} \cdot \vec{T}_{\text{SC}} \rangle$. (c) Pătratul pseudo-spinului total $\langle \vec{T}_{\text{tot}}^2 \rangle$.

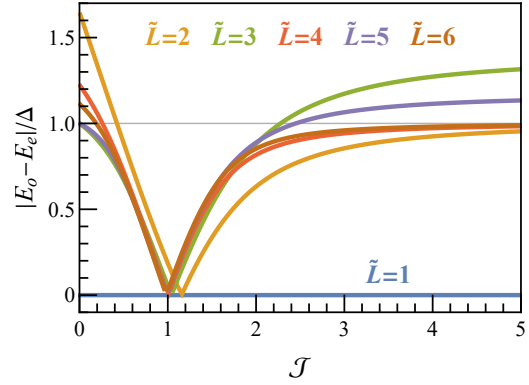


Fig. 12: La fel ca în fig.9, dar pentru modelul Kondo cu o singură specie fermionică, corespunzând cazului fizic QD-SC.

neechilibru (descrise de ecuații de evoluție de tip Lindblad).

Rezultate principale - Etapa VI. Metoda RBM generalizată poate descrie eficient proprietățile stărilor staționare de neechilibru, precum și a stărilor tranziente cu atenuare lentă, pe domenii întregi din spațiul de parametri pentru variate modele, precum sisteme de spin, modele Fermi-Hubbard, sau modele Rabi disipative.

Metoda bazei reduse pentru dinamica de neechilibru a sistemelor cuantice.

Pentru sisteme a căror dinamică este descrisă de ecuația Lindblad,

$$\partial_t \rho = -i[H, \rho] + \sum_n \gamma_n \left[L_n \rho L_n^\dagger - \frac{1}{2} \{L_n^\dagger L_n, \rho\} \right] \equiv \mathcal{L} \rho, \quad (22)$$

condiția pentru stările staționare de neechilibru se scrie ca

$$\partial_t \rho = \mathcal{L} \rho = 0. \quad (23)$$

Ideea abordării RBM generalizate este de a construi o reprezentare efectivă $\rho(\xi)$ de dimensionalitate joasă a matricii densitate pentru stările staționare de neechilibru, suficient de precisă pe un întreg domeniu de parametri de interes ξ . Folosim un număr relativ mic M de puncte de probă unde se calculează soluții exacte $\rho_\mu^{(\text{ex})}$. În subspațiul redus al acestora, avem $\rho^{(\text{rb})}(\xi) = \sum_{\mu=1}^M \alpha_\mu(\xi) \rho_\mu^{(\text{ex})}$,

unde $\sum_{\mu=1}^M \alpha_{\mu} = 1$ în acord cu condiția de normare $\text{Tr } \rho_{\mu}^{(\text{ex})} = 1$. Aici, coeficienții dezvoltării $\alpha_{\mu}(\xi)$ pentru orice valoare a parametrilor pot fi calculați prin minimizarea rezidului

$$\text{Res}(\xi) = ||\mathcal{L}(\xi) |\rho^{(\text{rb})}(\xi)\rangle|| = \langle \rho^{\text{RB}} | \mathcal{L}^\dagger \mathcal{L} | \rho^{\text{RB}} \rangle, \quad (24)$$

care cuantifică gradul la care condiția exactă din ecuația (23) este satisfăcută de soluția aproximativă $\rho^{(\text{rb})}$. Pentru calculul rezidului, diagonalizăm operatorul Hermitic pozitiv semi-definit $(\mathcal{L}^\dagger \mathcal{L})_{\mu\nu}$. Starea staționară de neechilibru în aproximația RBM va corespunde vectorului cu valoarea proprie cea mai joasă.

Ca aplicații demonstrative ale metodei RBM generalizate, considerăm modelul Heisenberg anizotrop pentru spin-1/2 (modelul XYZ) [Phys. Rev. Lett. 110, 257204 (2013)]. Într-o dimensiune, avem

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N-1} J_x \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + J_y \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + J_z \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z, \quad (25)$$

care este augmentat de operatorii de salt $L_n = \sigma_n^-$ pentru fiecare site, cu $\sigma_n^\pm = (\sigma_n^x \pm i\sigma_n^y)/2$. Evoluția rezidului în urma procesului construcție a bazei reduse este reprezentată în fig. 13 pentru un sistem de 5 spini. În panelul (h), este prezentată pentru comparație și diagrama de fază obținută în limită termodinamică printr-o abordare de câmp mediu.

De asemenea, am considerat un sistem unidimensional de fermioni descris de Hamiltonianul Fermi-Hubbard [arXiv:2405.09512]

$$H = -t \sum_n^{N-1} (c_{n+1}^\dagger c_n + H.c.) + U \sum_n^{N-1} \left(c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2} \right) \left(c_{n+1}^\dagger c_{n+1} - \frac{1}{2} \right), \quad (26)$$

augmentat de operatorii de salt $L_1 = \sqrt{\Gamma_L} c_1^\dagger$ și $L_2 = \sqrt{\Gamma_R} c_N$ ce descriu schimbul de electroni de la capetele rețelei cu două rezervoare având o diferență de potențial infinită (astfel încât sistemul să poată fi considerat Markovian). Rezultatele obținute pentru regiunea de parametri $\xi = (U, \delta) \in [0, 3t] \times [-0.2t, 0.2t]$ unde $\delta = (\Gamma_L - \Gamma_R)/2$ este asimetria în ratele de salt, cu $(\Gamma_L + \Gamma_R)/2 = 0.2t$, sunt prezentate în fig. 14.

În toate cazurile analizate am observat descreșterea rapidă a rezidului de-a lungul procesului iterativ de construcție a bazei reduse, indicând ca metoda RBM generalizată este potrivită pentru explorarea eficientă a spațiului de parametri pentru studiul stărilor staționare de neechilibru ale sistemelor cuantice.

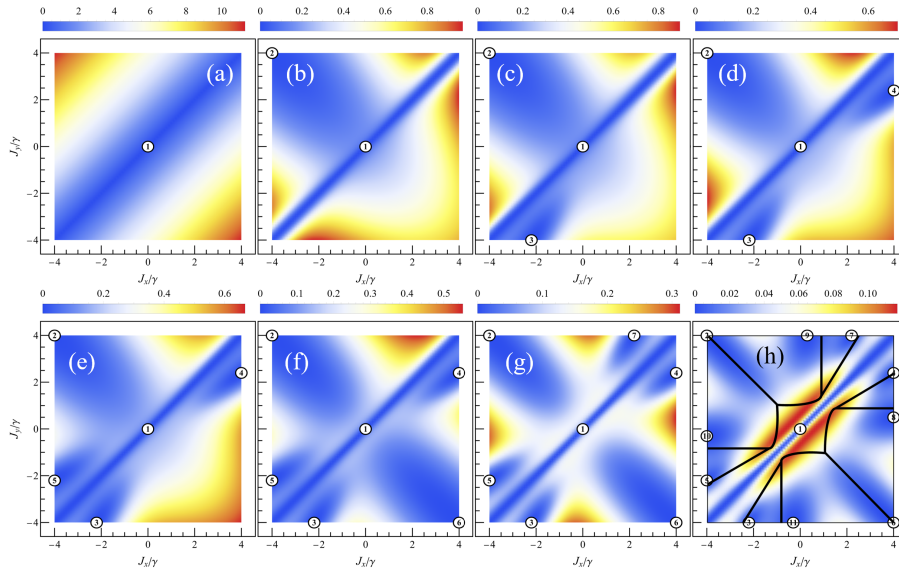


Fig. 13: Evoluția rezidului pentru modelul XYZ cu N=5 site-uri.

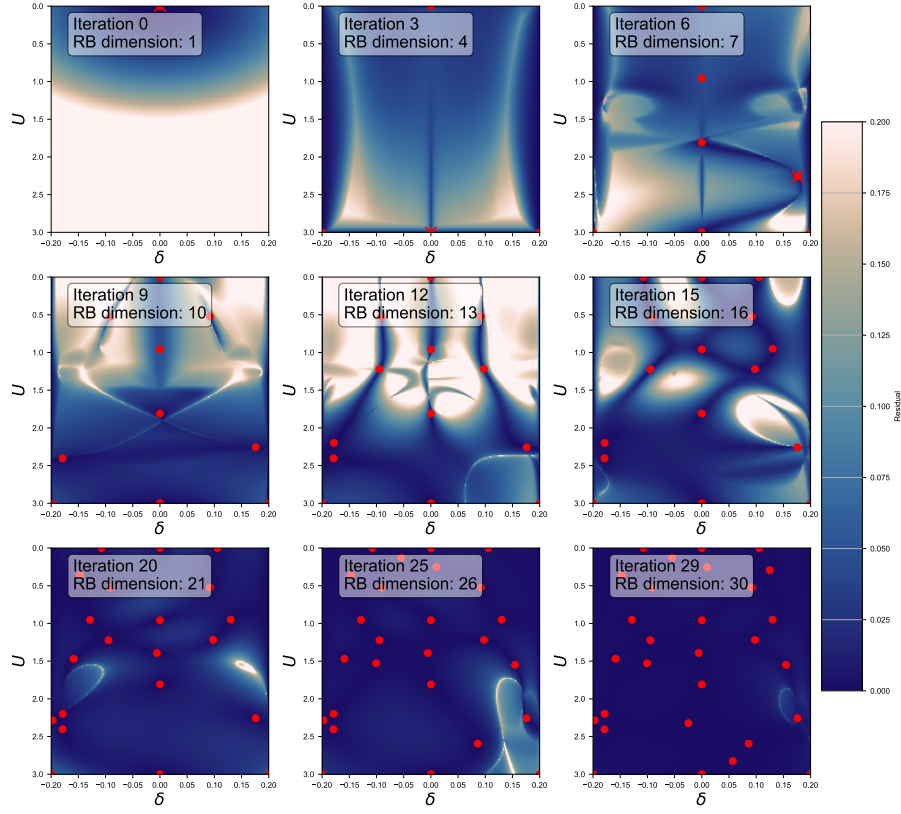


Fig. 14: Evoluția rezidualului pentru modelul Fermi-Hubbard cu $N=6$ site-uri.

Toate obiectivele propuse în cadrul etapelor I-VI ale proiectului au fost realizate, iar rezultatele obținute au fost/vor fi diseminate după cum urmează:

- Rezultatele din cadrul etapelor II-III incluse în lucrarea *BCS surrogate models for floating superconductor-semiconductor hybrids* au fost publicate în revista ISI Physical Review B (zona roșie), cu menționarea suportului financiar al proiectului.
- Rezultatele din cadrul etapei III au fost incluse în lucrarea *Spin-1 Haldane chains of superconductor-semiconductor hybrids*, publicată în revista ISI Physical Review B (zona roșie), cu menționarea suportului financiar al proiectului.
- Rezultatele din cadrul etapei IV au fost incluse în lucrările *Majorana modes in quantum dots coupled via a floating superconducting island* și *The poor man's Majorana tetron*, trimise spre publicare către revistele ISI Physical Review B și, respectiv, Physical Review X.
- Un manuscris bazat pe rezultatele obținute în cadrul etapei V este în pregătire.
- Un alt manuscris bazat pe rezultatele obținute în cadrul etapei VI este în pregătire.
- Rezultatele obținute în cadrul etapelor I-III ale proiectului au fost incluse în prezentarea orală *Spin-1 Haldane chains of super-semi hybrids*, susținută în cadrul "Workshop on Superconductor-Semiconductor Hybrids", 12-14 martie 2024, Center for Quantum Device, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Denmark precum și în cadrul workshop-ului "New Avenues in Quantum Materials – BalCon NAQM 2024", 29-31 august 2024, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden.
- Codurile numerice corespunzătoare fiecărei activități vor fi făcute liber disponibile pe platforma github.com.

Director proiect, Dr. Virgil V. Băran